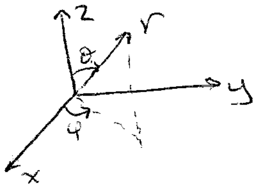
Mécanique Quantique
Séance 2

Exercice 1

L'équation de Shrödinger stationnaire pour une particule de masse m évoluant dans le potentiel central, est

$$H\varphi = E\varphi \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\varphi(r) = E\varphi(r) \qquad (1)$$

Les coordonées sphériques



$x = r\sin\theta\cos\varphi$
$y = r\sin\theta\sin\varphi$
$z = r\cos\theta$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

L'équation de Shr. est donc

$$\Bigg[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{\text{partie radiale}} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right)}_{\text{partie angulaire}} + \underbrace{V(r)}_{\text{radiale}}\Bigg]\psi(r,\theta,\varphi) = E\,\psi(r,\theta,\varphi)$$

On multiplie par $2mr^2$ et on voit que l'équation devient séparable

$$\left[-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) + 2mr^2V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$

Le moment angulaire est : $\vec{L} = \vec{R}\times\vec{P} = -i\hbar r\,(\vec{r}\times\vec{\nabla})$

et en coordonées sphériques : $\vec{L} = -i\hbar\left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$

$$\Rightarrow L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] =$$

Alors : $\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r - \frac{1}{\hbar^2 r^2}L^2$

et au final le (1) devient $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right) + V(r)\right]\cdot\varphi(r) = E\varphi(r)$

Exercice 2

Les 3 unités basiques sont : L, M, T (longueur, masse, temps)
et $\hbar, \omega, m \propto L, M, T$

Pour les unités d'énergie :

$$\underline{E} = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar/\lambda)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad , a : \text{unités de longueur}$$

$$[a] = L^1 M^0 T^0$$

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} = \hbar\omega \Rightarrow a^2 = \frac{\hbar}{\omega 2m} \Rightarrow a = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} = [L]$$

En posant $2m = \omega = \hbar = a = 1$, on a

$$\text{Shr} : \left(-\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r + \frac{L^2}{r^2} + V(r)\right)\varphi(r) = E\varphi(r)$$

Exercice 3

$$\text{Shr} : \left(-\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{r^2} + \tilde{V}(r)\right)\varphi(r) = E\varphi(r)$$

$$\tilde{V}(r) = \frac{V(r)}{\frac{\hbar^2}{2ma^2}} \Rightarrow \tilde{V}(r) = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V(r)$$

$\tilde{V}(r)$ est le potentiel $V(r)$ divisé par l'unité d'énergie
donc $\tilde{V}(r)$ est exprimé en unités naturelles.

$$\varphi(r) = r^{-1} u_l(r) Y_l^m(\Omega)$$

Donc l'éq. de Shr. devient :

$$\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r + \frac{\hat{L}^2}{r^2} + \tilde{V}(r)\right)\cdot\frac{1}{r} u_l(r) Y_l^m(\Omega) = E\,\frac{u_l(r)}{r}\,Y_l^m(\Omega)$$

On sait que $\hat{L}^2 Y_l^m(\Omega) = l(l+1) Y_l^m(\Omega)$

Donc $$\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r + \frac{l(l+1)}{r^2} + \tilde{V}(r)\right)\frac{1}{r} u_l(r)\, \cancel{Y_l^m(\Omega)} = \frac{E\,u_l(r)}{r}\,\cancel{Y_l^m(\Omega)}$$

Y_l^m est un terme qui dépend seulement de les angles θ, φ,
donc on peut le simplifier.
En particulaire, pour l'onde s, on $l = 0$, Y_0^m = constante.

Alors on a une equation radiale

$$\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+\tilde{V}(r)\right)\frac{u_\ell(r)}{r}=E\frac{u_\ell(r)}{r}$$

$$\left(-\frac{1}{\cancel{r}}\right)\cdot\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[\frac{1}{\cancel{r}}\cdot\cancel{r}\cdot u_\ell(r)\right]+\left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+\tilde{V}(r)\right)\frac{u_\ell(r)}{\cancel{r}}=E\frac{u_\ell(r)}{\cancel{r}}$$

($\frac{\partial^2}{\partial r^2}$ est comme un opérateur qui applique sur $\frac{1}{r}\cdot r\cdot u_\ell(r)$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+\tilde{V}(r)\right)u_\ell(r)=E\,u_\ell(r) \qquad (2)$$

Pour l'onde s, $l=0$, donc

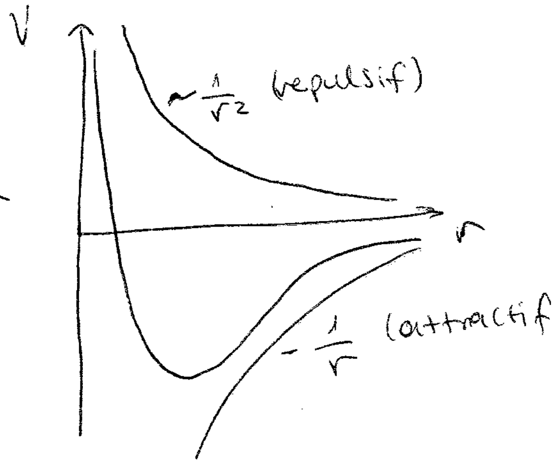
$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\tilde{V}(r)\right)\cdot u_\ell(r)=E\,u_\ell(r)$$

(Dans l'équation (2) on peut introduire le potentiel effectif.

$$\tilde{V}^{\ell}_{eff}(r)=\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}+\tilde{V}(r)$$

pour que l'éq. soit: $\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\tilde{V}^{\ell}_{eff}(r)\right)u_\ell(r)=E\,u_\ell(r)$

pour l'onde s, $\tilde{V}^{0}_{eff}(r)=\tilde{V}(r)$)

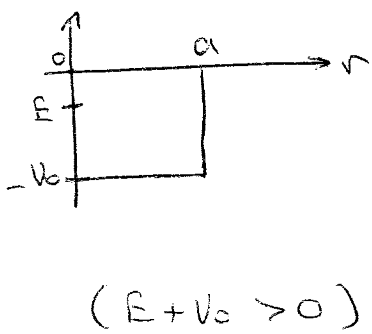


Donc finalement, pour $l=0$

$$\begin{cases} -u_0''(r)-V_0\,u_0(r)=E\,u_0(r), & r<1 \\ -u_0''(r)=E\,u_0(r) & ,r>1 \end{cases}$$

Exercice 4

Cas $-V_0<E<0$



def: $\begin{cases} \alpha=\sqrt{V_0+E} & (E+V_0>0) \\ \varepsilon=\sqrt{-E} & (-E>0) \end{cases}$

$$\begin{cases} u_0''(r) + (V_0 + E)\, u_0(r) = 0 & , r<1 \\ u_0''(r) + E\, u_0(r) = 0 & , r>1 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} u_0''(r) + a^2 u_0(r) = 0 & , \quad r<1 \quad (I) \\ u_0''(r) - \varepsilon^2 u_0(r) = 0 & , \quad r>1 \quad (II) \end{cases}$$

La solution d'une éq. differencielle : $y'' + py' + qy = 0$
Le polyonyme characteristique est : $\lambda^2 + p\lambda + q = 0$

$\Rightarrow r<1$: $\lambda_{1,2} = \pm i a$, $\qquad \lambda_{1,2} = \pm\sqrt{-q}$

$r>1$: $\lambda_{1,2} = \pm \varepsilon$

$$\Rightarrow \begin{cases} u_0(r) = A\sin(ar) + B\cos(ar) & , r<1 & , A,B \in \mathbb{C} \\ u_0(r) = Ce^{-\varepsilon r} + De^{+\varepsilon r} & , r>1 & , C,D \in \mathbb{R} \end{cases}$$

- Conditions aux bords :

i) $u(0) = 0 \Rightarrow B = 0$

ii) $u(r) < r \rightarrow$ terme $\sim e^{\varepsilon r}$ serait divergent $\Rightarrow D = 0$

- Conditions de continuité :

i) $\varphi_I(r=1) = \varphi_{II}(r=1) \Rightarrow A\sin a = Ce^{-\varepsilon}$

ii) $\varphi_I'(r=1) = \varphi_{II}'(r=1) \Rightarrow Aa\cos a = -\varepsilon C e^{-\varepsilon}$

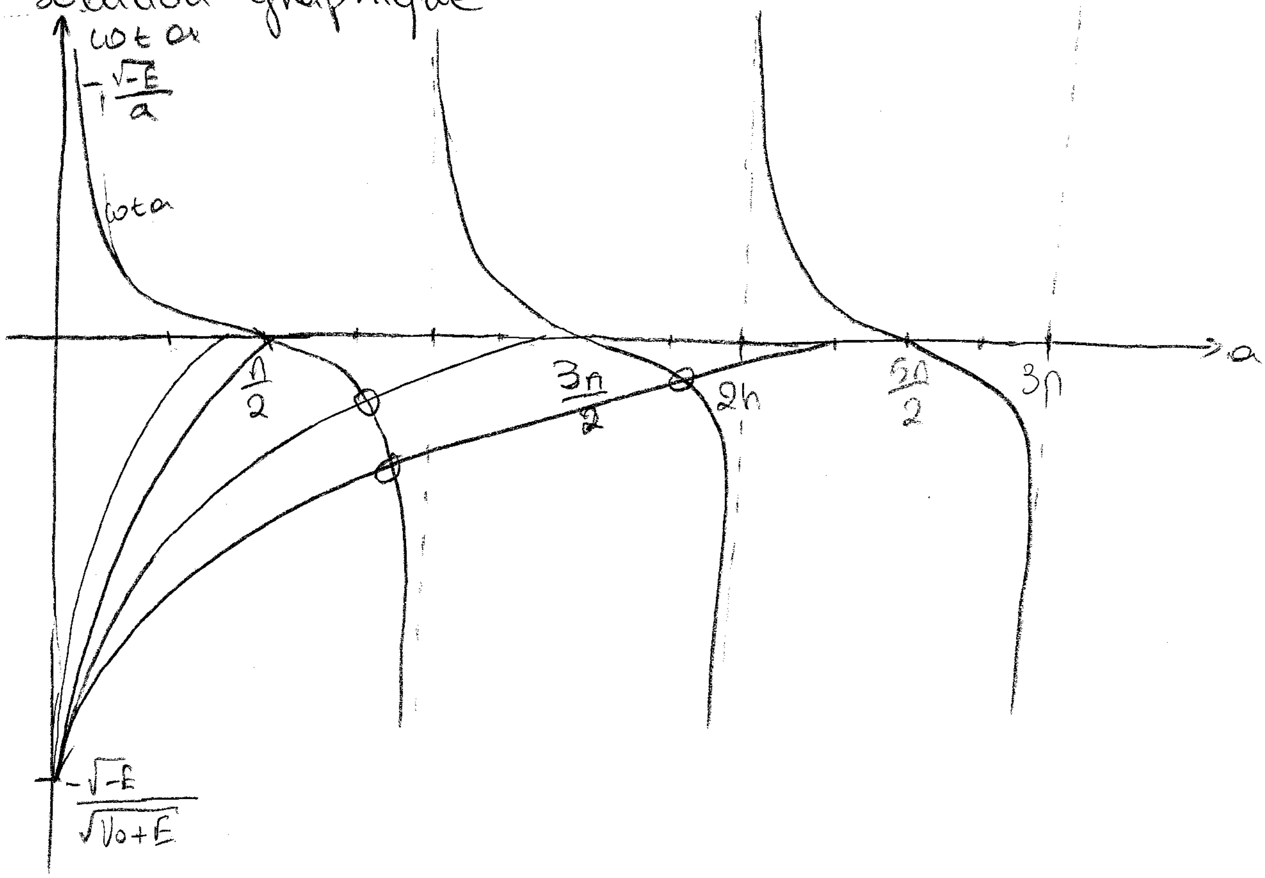
$$\Rightarrow \begin{vmatrix} \sin a & e^{-\varepsilon} \\ a\cos a & -\varepsilon e^{-\varepsilon} \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow -\sin a \cdot \varepsilon \cdot e^{-\varepsilon} - a\cos a\, e^{-\varepsilon} = 0$$

$$\Rightarrow \varepsilon \sin a + a\cos a = 0$$

$$\Rightarrow \cot a = -\frac{\varepsilon}{a} = -\frac{\sqrt{V_0 - a^2}}{a}$$

Exercice 5

Solution graphique



Condition de quantification des énergies liés

$$\cot(\sqrt{V_0+E}) = -\sqrt{\frac{-E}{V_0+E}}$$

- Si $0 \leq \sqrt{V_0} \leq \frac{\pi}{2}$ → pas d'état lié
- Si $\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{V_0} \leq \frac{3\pi}{2}$ → un état lié
- Si $\frac{3\pi}{2} \leq \sqrt{V_0} \leq \frac{5\pi}{2}$ → deux états liés

$\Rightarrow$

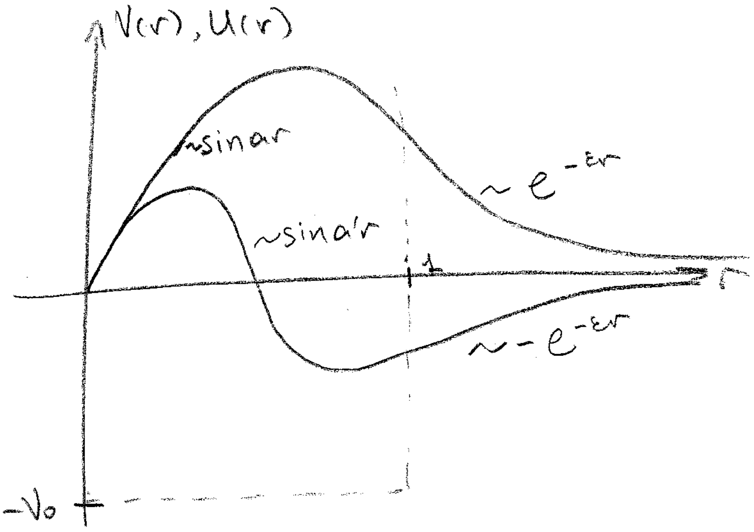
Pour $(n-\frac{1}{2})\pi \leq \sqrt{V_0} \leq (n+\frac{1}{2})\pi$ → n états liés

Exercice 6

$$\begin{cases} u_0(r) = A\sin(ar) &, r<1 \\ u_0(r) = A\sin a\, e^{\varepsilon} e^{-\varepsilon r} &, r>1 \end{cases}$$

Valeurs propres de l'énergie (de $\cot(a) = -\frac{\varepsilon}{a}$) correspondant aux valeurs propres de l'énergie des états impairs d'un puits carré 1D.

Cas : deux états 's' liés



Normalization : $\int_{-\infty}^{+\infty} d^3x\, |\psi(x)|^2 = 1$

$$\Rightarrow \int_0^\infty \int_0^\pi \int_{-\pi}^{\pi} dr\, d\theta\, d\varphi\, \cancel{r^2} \sin\theta\, \frac{u_0^2(r)}{\cancel{r^2}}\, |Y_\ell^m(\theta,\varphi)| = \int_0^\infty dr\, |u_0(r)|^2 = 1$$

(Les harmoniques sphériques sont déjà normées)

$$\int_0^\infty dr\, |u_0(r)|^2 = 1 \Rightarrow \int_0^1 dr\, A^2 \sin^2(ar) + \int_1^\infty dr\, A^2 \sin^2(a)\, e^{2\varepsilon} e^{-2\varepsilon r} = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^1 dr\, A^2 \sin^2(ar) + A^2 \sin^2 a\, e^{2\varepsilon} \left[-\frac{1}{2\varepsilon} e^{-2\varepsilon r}\right]_1^\infty = 1$$

$$\Rightarrow A^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{\sin(2a)}{4a} + \frac{\sin^2(a)}{2\varepsilon}\right) = 1$$

(on sait que $\varepsilon \sin a = -a\cos a$)

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{\sin 2a}{4a} + \frac{\sin^2 a}{2\varepsilon}}}$$

$$\frac{1}{2} - \frac{\sin 2a}{4a} + \frac{\sin^2 a}{2\varepsilon} = \frac{1}{2} - \frac{2\cancel{\sin a}\cos a}{2}\left(-\frac{1}{\varepsilon}\frac{\cos a}{\cancel{\sin a}}\right) + \frac{1-\cos^2 a}{2\varepsilon}$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2\varepsilon}$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{\varepsilon+1}}$$

Exercice 7

$$P_{nr} = \int_1^\infty |U_{n_r0}(r)|^2 dr = \frac{\sin^2 a}{2\varepsilon} \cdot \frac{1}{\frac{1}{2} - \frac{\sin(2a)}{4a} + \frac{\sin^2 a}{2\varepsilon}}$$

$$= \frac{\sin^2 a}{\sin^2 a\left(\frac{\varepsilon}{\sin^2 a} - \frac{\varepsilon}{a}\frac{\cos a}{\sin a} + 1\right)}$$

$$= \frac{1}{\varepsilon\left(1 + \frac{\varepsilon^2}{a^2} + \frac{\varepsilon}{a^2}\right) + 1} = \frac{1}{(\varepsilon+1)\left(1+\frac{\varepsilon^2}{a^2}\right)} = \frac{V_0 + E}{(1+\varepsilon)\, V_0}$$

(en utilisant $\frac{1}{\sin^2 a} = 1 + \frac{\cos^2 a}{\sin^2 a}$ et $\frac{\cos a}{\sin a} = -\frac{\varepsilon}{a}$)

Exercice 8

Systeme proton-neutron

r = distance entre les deux particuls

m = masse réduit

a) $m = \frac{m_N m_P}{m_N + m_P} = 8{,}36887 \cdot 10^{-28}$ kg $= 469{,}45912$ MeV/c^2

$m_N = 1{,}674927 \cdot 10^{-27}$ kg $= 939{,}56536$ MeV/c^2

$m_P = 1{,}672622 \cdot 10^{-27}$ kg $= 938{,}27203$ MeV/c^2

Unité d'énergie $\frac{\hbar^2}{2ma^2} \simeq 2{,}95 \cdot 10^{-22}$ J $\simeq 18{,}4316$ MeV

(1 eV $= 1{,}602 \cdot 10^{-19}$ J)

b) $V_0 = 59{,}64$ MeV

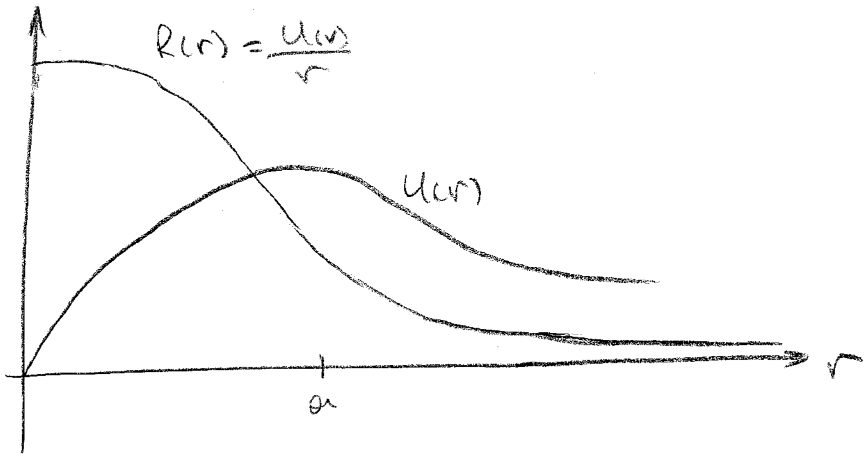
$$\tilde{V}_0 = \frac{59{,}64}{18{,}4316} \simeq 3{,}236$$

$\sqrt{V_0} \simeq 1{,}8 > \frac{\pi}{2} \simeq 1{,}571 \Rightarrow$ un état lié

c) Résoudre $\cot(a) = -\frac{\sqrt{V_0 - a^2}}{a} \Rightarrow a \simeq 1{,}7689$

$\Rightarrow \sqrt{E_0 + V_0} = a \Rightarrow E_0 = a^2 - V_0 = -0{,}126 \Rightarrow E_0 \simeq -2{,}225$ MeV

· d) $\varepsilon_{\infty} = -0{,}355 \Rightarrow P_{00} \simeq 71\%$



Energie liaison deuton experimentale : 2,224 565.. MeV
[Kessler et al. PLA 255 (1999) 221-9)]